



TITLE:

7段数6次陽的Runge-Kutta法の特性と最適化及び2段数陰的Runge-Kutta法の特性について(数式処理と数学研究への応用)

AUTHOR(S):

田中, 正次; 高山, 尚文; 三村, 和正; 山下, 茂

CITATION:

田中, 正次 ...[et al]. 7段数6次陽的Runge-Kutta法の特性と最適化及び2段数陰的Runge-Kutta法の特性について(数式処理と数学研究への応用). 数理解析研究所講究録 1987, 612: 126-143

ISSUE DATE:

1987-02

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/99772>

RIGHT:

7 段数 6 次陽的 Runge - Kutta 法の特性と最適化及び

2 段数陰的 Runge - Kutta 法の特性について

山梨大学 工学部

計算機科学科

田中 正次 (Masatsugu Tanaka)
高山 尚文 (Naofumi Takayama)
三村 和正 (Kazumasa Mimura)
山下 茂 (Shigeru Yamashita)

この論文は以下に示す I, II の二つのテーマについて研究する。

数学ソフトウェアが作られ実用化されている陽的 Runge - Kutta 法は、能率の観点から (4 次, 5 次) 型, (5 次, 6 次) 型, (6 次, 7 次) 型高次埋め込み公式の形式をとっているものが多い。6 次法はこれらの実用公式の中で中心的な役割を果たしているため、この公式の数値計算上重要な特性を研究し、その本質を明らかにすることは極めて有意義であると思われる。

この論文は、そのような立場に立って、Butcher の詳細な指示に従って求められた 7 段数 6 次法の解系について、安定性とある尺度によって測られた最良の打ち切り精度の間の相互関係を研究し、それをグラフに表現する。ついで、その図を用いて既知公式の評価と改良、特徴のある新公式の導出を試みる。以上が研究のテーマ I である。

研究テーマ II は、近年 Stiff 問題の解法として有望視されている陰的 Runge - Kutta 法の特性の研究である。すなわち、ここではもっとも簡単な 2 段数陰的 Runge - Kutta 法を取りあげ、上の 7 段数 6 次陽的 Runge - Kutta 法の場合と同様に、安定性と打ち切り精度の間の相互関係を研究し、それをグラフで表現する。

ついでその図を用いて既知公式を評価し、その改良の可能性を探る。特に安定性については、テスト方程式に対して定義された A 安定性などの古典的な安定性の概念と、新たに展開されてきた直接生微分方程式に対して定義された B 安定, BN 安定, 代数的安定などのより強い安定性の概念の両者について考察する。

I 7 段数 6 次陽的 Runge - Kutta 法の特性と最適化

はじめに

最近、高次の陽的 Runge - Kutta 法が注目されている。それは、高次陽的 Runge - Kutta 法の計算能率の高さと、次数条件式群の単純化の研究の進展、数式処理技術の進歩により高次法誘導の可能性がにわかに高まってきたことなどによるものと思われる。このような学会の動向に呼応して、我々も 7 段数 6 次陽的 Runge - Kutta 法の解系を誘導し、その解系の特性を調査し公式の最適化を行ったのでその結果を報告する。

解系の誘導には数式処理言語 Reduce 3. 0 (東大計算機センター HITAC M-280) と Reduce 3. 1 (梨大計算機科学科 VAX11/785) を利用した。また最適化には、非線形最小二乗法のサブルーチンパッケージ¹⁵を利用した。

BUTCHER (3)

<u>1</u>	<u>1</u>						
3	3						
<u>2</u>		<u>2</u>					
3	0	3					
<u>1</u>	<u>1</u>	<u>1</u>	<u>-1</u>				
3	12	3	12				
<u>1</u>	<u>-1</u>	<u>9</u>	<u>-3</u>	<u>-3</u>			
2	16	8	16	8			
<u>1</u>		<u>9</u>	<u>-3</u>	<u>-3</u>	<u>1</u>		
2	0	8	8	4	2		
	<u>9</u>	<u>-9</u>	<u>63</u>	<u>18</u>		<u>-16</u>	
1	44	11	44	11	0	11	
<hr/>							
	<u>11</u>		<u>27</u>	<u>27</u>	<u>-4</u>	<u>-4</u>	<u>11</u>
	120	0	40	40	15	15	120

(5)

BUTCHER (4)

1	1						
<u>2</u>	<u>4</u>	<u>2</u>					
3	9	9					
<u>1</u>	<u>11</u>	<u>1</u>	<u>-1</u>				
3	36	9	12				
<u>-1</u>	<u>151</u>	<u>29</u>	<u>-7</u>				
3	36	9	4	-6			
<u>4</u>	<u>-112</u>	<u>116</u>	<u>32</u>				
3	9	9	3	18	-2		
	<u>-5</u>	<u>-29</u>	<u>397</u>	<u>152</u>	<u>-10</u>	<u>1</u>	
1	4	23	276	69	69	69	
<hr/>							
	<u>22</u>		<u>29</u>	<u>29</u>	<u>-1</u>	<u>-1</u>	<u>23</u>
	160	0	80	80	160	160	160

(6)

BUTCHER (5)

<u>1</u>	<u>1</u>						
2	2						
<u>2</u>	<u>4</u>	<u>2</u>					
3	9	9					
<u>1</u>	<u>7</u>	<u>2</u>	<u>-1</u>				
3	36	9	12				
<u>5</u>	<u>-35</u>	<u>-55</u>	<u>35</u>	<u>15</u>			
6	144	36	48	8			
<u>1</u>	<u>-1</u>	<u>-11</u>	<u>-1</u>	<u>1</u>	<u>1</u>		
6	360	36	8	2	10		
	<u>-41</u>	<u>22</u>	<u>43</u>	<u>-118</u>	<u>32</u>	<u>80</u>	
1	260	13	156	39	195	39	
<hr/>							
	<u>13</u>		<u>11</u>	<u>11</u>	<u>4</u>	<u>4</u>	<u>13</u>
	200	0	40	40	25	25	200

(7)

m 段数 r 次陽的 Runge - Kutta 法 (以下陽的を省略する。またときにはより簡単に陽的 Runge - Kutta 法を省略する)

$$\begin{aligned} k_i &= h_n f(x_n + c_i h_n, y_n + \sum_{j=0}^{i-1} b_{ij} k_j) \quad c_i = b_{i0} = 0 \quad (i=1, 2, \dots, m) \\ h_n &= x_{n+1} - x_n \\ y_{n+1} &= y_n + \sum_{i=1}^m a_i k_i \quad (n=0, 1, \dots) \end{aligned} \quad (10)$$

の第 (n+1) ステップにおける局所打ち切り誤差は、

$$T_{n+1} = h_n^{r+1} \cdot g(x_n, y_n) + O(h_n^{r+2}) \quad (11)$$

と表すことができる。ここで $g(x_n, y_n)$ は、

$$g(x_n, y_n) = \sum_{i=1}^{1r} a_{ri} \cdot g_i(x_n, y_n) \quad (12)$$

と表され、 a_{ri} は方法 (10) の係数のみの関数、 $g_i(x, y)$ は $f(x, y)$ に依存して決まる関数ベクトル、 $1r$ は方法 (10) の次数と方程式 (1) が単一か連立かによって定まる自然数である。ここでは局所打ち切り誤差の大きさを判定するために、次のよく知られた判定基準

$$A_{r2} = \sum_{i=1}^{1r} |a_{ri}| \quad (13)$$

$$A_{r3} = \sum_{i=1}^{1r} a_{ri}^2 \quad (14)$$

を使用する。(13) または (14) によって定義される A_{r2}, A_{r3} を m 段数 r 次 Runge - Kutta 法 (10) の打ち切り精度判定基準という。

全ての係数が非負で、 $0 \leq c_i \leq 1 \cdot 0$ および $c_i \leq c_j (i < j)$ が満足されるとき、方法 (10) は単調であるという。単調性は、その方法の丸め誤差に関する品質を保証するものである。¹²⁾

方法 (10) の 公式の丸め誤差に関する性質を判定するために、次の数量 R を用いる。

$$R = \sum_{i=1}^m |a_i| + \sum_{i=2}^m \sum_{j=1}^{i-1} |b_{ij}| \quad (15)$$

また、その方法が単調であるか否かを調べる。この数量 R を丸め誤差特性判定基準と呼ぼう。係数の簡単さは、

- (1) 零係数の数
- (2) 係数が有理数 (分数) であるとき最大分母の桁数
- (3) 無理係数であるか否かのチェック

によって判断する。無理係数はかなり複雑なものとして評価する。係数の簡単さは、数値解の丸め誤差や計算能率に関係する。ここでは係数の簡単さは問題にしない。

安定性のテスト方程式

$$y' = \lambda y \quad (\lambda \text{ は複素定数}) \quad (16)$$

に、m 段数 r 次 Runge - Kutta 法 (10) を適用し、次数条件式を用いて簡単にすると、漸化式

$$y_{n+1} = p_{n,r}(h_n \lambda, \tau_{r+1}, \tau_{r+2}, \dots, \tau_n) y_n \quad (n=0, 1, 2, \dots) \quad (17)$$

が得られる。ここで $p_{n,r}(h_n \lambda, \tau_{r+1}, \tau_{r+2}, \dots, \tau_n)$ は、次に示すような $h_n \lambda$ に関する m 次の多項式である。

$$\begin{aligned} p_{n,r}(h_n \lambda, \tau_{r+1}, \tau_{r+2}, \dots, \tau_n) \\ = \sum_{k=0}^r \frac{(h_n \lambda)^k}{k!} + \sum_{i=r+1}^m \tau_i \frac{(h_n \lambda)^i}{i!} \end{aligned} \quad (18)$$

ただし、 $\tau_i (i=r+1, r+2, \dots, m)$ は、方法 (10) の係数のみの関数である。多項式 (18) を m 段数 r 次 Runge - Kutta 法 (10) の安定多項式という。以下 m 段数 r 次 Runge - Kutta 法 (10) の安定性の優劣を判定する上で重要な 3 つの概念について述べよう。

次式によって定義される複素平面上の開領域 $s(\tau_{r+1}, \tau_{r+2}, \dots, \tau_n)$ を、m 段数 r 次 Runge - Kutta 法 (10) の絶対安定領域という。

$$\begin{aligned} s(\tau_{r+1}, \tau_{r+2}, \dots, \tau_n) \\ = \{h_n \lambda \mid |p_{n,r}(h_n \lambda, \tau_{r+1}, \tau_{r+2}, \dots, \tau_n)| \leq 1, h_n \lambda \text{ は複素数}\} \end{aligned} \quad (19)$$

また、原点を含む $s(\tau_{r+1}, \tau_{r+2}, \dots, \tau_n)$ の単連結な閉部分領域 $s_0(\tau_{r+1}, \tau_{r+2}, \dots, \tau_n)$ を有効絶対安定領域と呼び、その面積を $A(s_0(\tau_{r+1}, \tau_{r+2}, \dots, \tau_n))$ によって表すことにする。(図 1 を参照)

有効絶対安定領域 $s_0(\tau_{r+1}, \tau_{r+2}, \dots, \tau_n)$ と実軸 R との交わり $s_1(\tau_{r+1}, \tau_{r+2}, \dots, \tau_n)$ すなわち

$$\begin{aligned} s_1(\tau_{r+1}, \tau_{r+2}, \dots, \tau_n) &= s_0(\tau_{r+1}, \tau_{r+2}, \dots, \tau_n) \cap \mathbb{R} \\ &= [-\alpha(\tau_{r+1}, \tau_{r+2}, \dots, \tau_n), 0] \end{aligned} \quad (20)$$

を、m 段数 r 次 Runge - Kutta 法 (10) の絶対安定区間という。ただし、有効絶対安定領域の左側に接触している絶対安定領域の閉部分領域 $s_0(\tau_{r+1}, \tau_{r+2}, \dots, \tau_n)$ が存在する場合 (図 1 はその場合である) には、絶対安定区間の定義式は、(20) において $s_0(\tau_{r+1}, \tau_{r+2}, \dots, \tau_n)$ を $s_0(\tau_{r+1}, \tau_{r+2}, \dots, \tau_n) \cup s_0(\tau_{r+1}, \tau_{r+2}, \dots, \tau_n)$ で置き換えたものになる。ここで $\alpha(\tau_{r+1}, \tau_{r+2}, \dots, \tau_n)$ は絶対安定区間の長さを

表す。上の定義から明らかなように、 m 段数 r 次Runge-Kutta法(10)の安定性の優劣は、有効絶対安定領域の面積 $A(s_r(\gamma_{r+1}, \gamma_{r+2}, \dots, \gamma_n))$ や絶対安定区間の長さ、 $\alpha(\gamma_{r+1}, \gamma_{r+2}, \dots, \gamma_n)$ によって判定することができる。

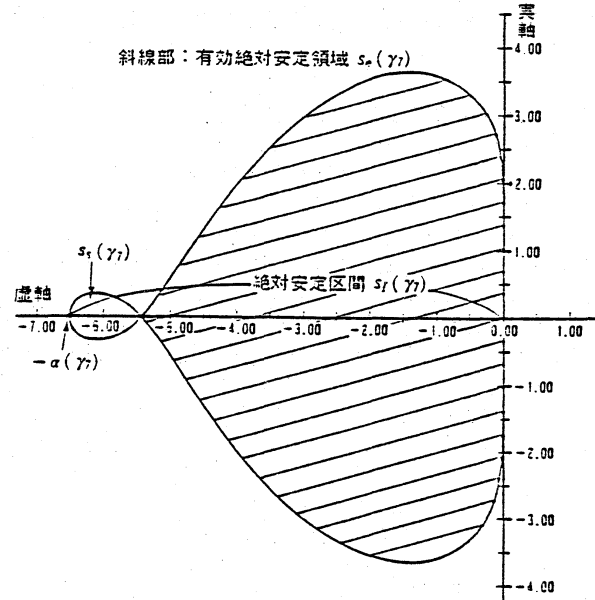


図1 絶対安定領域・有効絶対安定領域・絶対安定区間
(7段数6次法の一例)

§3 既知公式の特性

7段数6次法の既知公式の特性値の一覧を表-2に示す。

これは当研究室で開発中の陽的Runge-Kutta法診断プログラムによって得られた資料の1部を抜粋して一覧表にしたものである。

表-2 既知公式の特性値

公 式 名	打ち切り精度判定基準		安定性の尺度		丸め誤差
	$A_{\theta 2}$	$A_{\theta 3}$	$A(Se)$	S	
Butcher(1)	8.839973E-3	5.626540E-6	12.29469	-2.8656	1.190E+1
Butcher(2)	5.323707E-3	3.087794E-6	25.10979	-4.2070	3.173E+1
Butcher(3)	6.751209E-3	2.255901E-6	12.21663	-2.8561	1.352E+1
Butcher(4)	1.61968 E-1	4.44844 E-3	12.21663	-2.8561	8.053E+1
Butcher(5)	1.133495E-2	3.070792E-4	12.21663	-2.8561	1.537E+1
Lawson	1.183824E-1	8.438814E-4	23.03278	-6.4628	2.081E+2
*Shanks	1.804269E-3	2.108041E-7	24.07329	-4.0622	2.355E+3
Huta(1)	3.089031E-3	2.286001E-6	22.92	-4.0337	
Huta(2)	1.112971E-2	8.059568E-5	22.30	-3.8400	

Shanksの公式の特性値は6次法と見なした場合の数値である。

§4 7段数6次法の解系とその特性

4.1 7段数6次法の解系

Butcherの解系は6次法の次数条件式以外に次の3つの条件を満足するものである。¹⁾

$$\sum_{j=1}^7 a_i b_{ij} = a_i (1 - c_i) \quad (21)$$

$$\sum_{j=1}^7 b_{ij} c_j = 1/2 c_i^2 \quad (22)$$

$$a_i = 0 \quad (i=1, 2, \dots, 7) \quad (23)$$

Butcherは誘導の要点を示しているが、解系を明瞭な形では書き下していないので、我々はまず (C_2, C_3, C_5, C_6) を自由パラメータとするそれを導いた。(紙面の都合により解系は割愛する。)

4. 2 解系の打ち切り精度と安定性の関係

まず、自由パラメータ (C_2, C_3, C_5, C_6) の1つと安定性を支配するパラメータ γ_1 を入れ換える。ここでは自由パラメータ (C_2, C_3, C_5, C_6) から $(C_2, \gamma_1, C_5, C_6)$ に変換した。次に、 γ_1 の十分広い変域上にとられた微小間隔の等分点に対応する各 γ_1 に対して、 C_2, C_5, C_6 の各々を閉区間 $[0.0, 1.0]$ 上で変動させ最小化した A_{ss} (それを $A_{ss}(\gamma_1)$ で表そう)を求め、 $\gamma_1 - \log_{10} A_{ss}(\gamma_1)$ 曲線を描く。ついで縦軸に $A(Se(\gamma_1))$ をとり、上記の γ_1 の変域に対して $\gamma_1 - A(Se(\gamma_1))$ 曲線を描く。また同図上に各既知公式の γ_1 及び $\log_{10} A_{ss}$ を両座標とする点をプロットし、それに公式名を付記する。Butcherによる解系は、 γ_1 と C_3 の変換過程において共役な2つの場合が出てくるので、2通りの関係図ができる。それらを図2及び図3に示す。

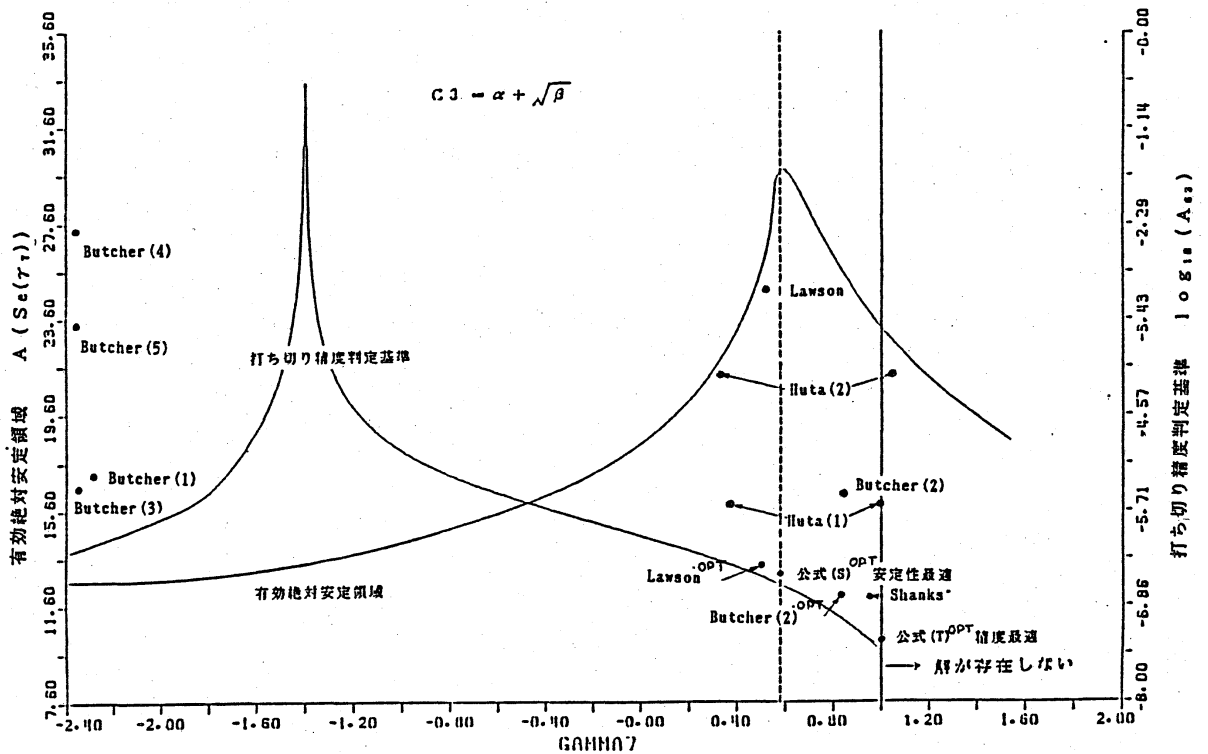


図 2 安定性と打ち切り精度の関係 < 1 >

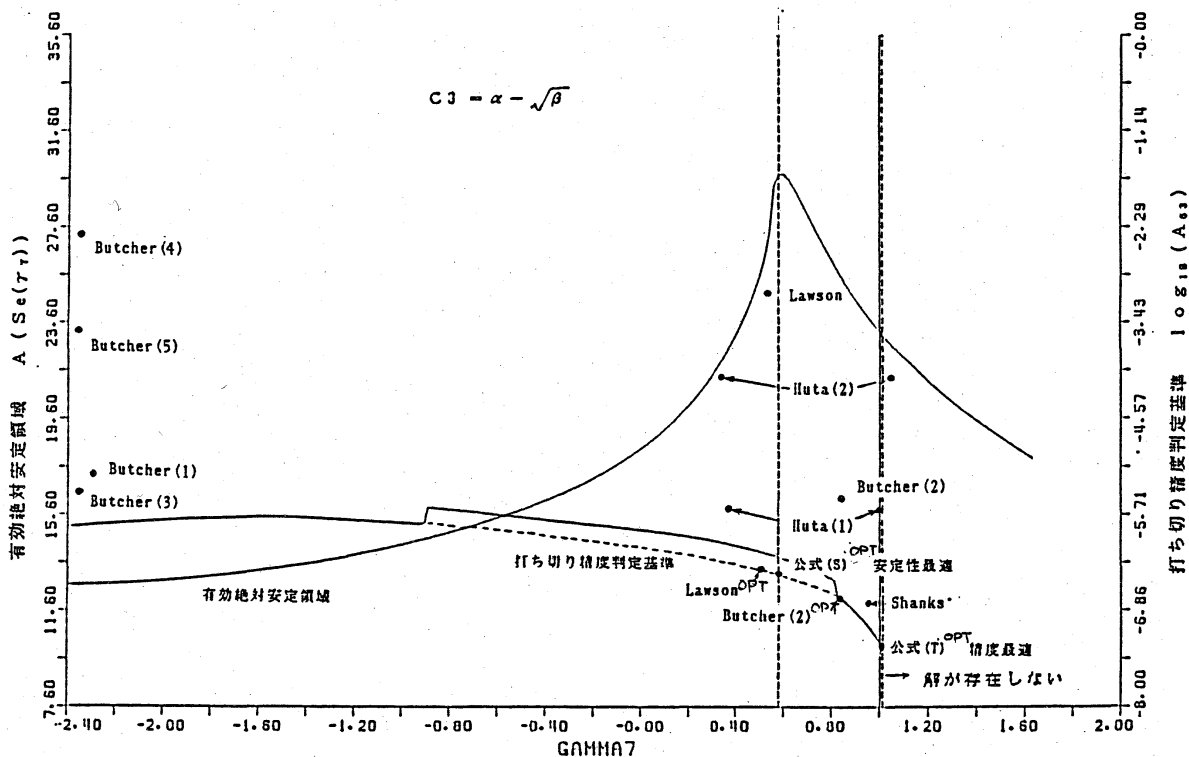


図3 安定性と打ち切り精度の関係 <2>

4.3 特性図の考察

図2及び図3の観察から次のような結論が得られる。

- (1) Butcherの解系は、7段数で実質7次の公式を含まない。
- (2) Butcherの解系に含まれる全ての既知公式は、以下に述べるように安定性を変えずに打ち切り精度の面でなお十分改良可能である。
- (3) 有効絶対安定領域の面積最大の公式が得られていない。このような公式を導くことは有意義であろう。
 ① Lawsonの公式は絶対安定区間最大の公式で、なお打ち切り精度の面で十分改良可能である。勿論既知公式中では安定性が最良である。
- (4) Butcher(1)、(2)、(3)の3公式を比較するとき、打ち切り精度はほぼ同等なので、安定性の著しく優っているButcher(2)を選ぶべきであることが分かる。またButcher(2)は、打ち切り精度の面でなお改良可能であることが分かる。
 Butcher(4)及び(5)は打ち切り精度がButcher(1)～(3)に比べて著しく劣っている上に安定性も不良である。
- (5) Hutaの2公式⁴⁾は、8段数であるにもかかわらず、性能上Butcher(2)より優れているとはいえない。

§5 既知公式の改良と新公式の誘導

安定性と打ち切り精度の関係を描いたグラフ上より特に有意義な既知公式を選び、打ち切り精度の観点から最適化を行った。その結果、安定性に関する性質を変えないで打ち切り精度をかなり改良することができた。Butcher(2)及びLawsonの最適化公式をそれぞれButcher(2)⁵⁾、Lawson⁵⁾、また有効絶対安定領域の面積の観点から最適化を行った公式を公式(S)⁵⁾、打ち切り精度最良の公式を公式(T)⁵⁾と呼ぶことにする。

次にこれらの4公式を示そう。また、表-3にこれらの公式の特性値を示す。この表と表-2を比較することにより、既知公式の改良の模様と新公式の優れていることが認識されよう。

次にこれらの4公式を示そう。また、表3にこれらの公式の特性値を示す。この表と表2を比較することにより、既知公式の改良の模様と新公式の優れていることが認識されよう。

* 最適化公式 1: Butcher (2) ^{opt}

<u>88639</u>	1+ <u>88639</u>						
2619732	2619732						
<u>152483</u>	<u>-309553</u>	<u>1119988</u>					
827533	975054	2232231					
<u>713503</u>	<u>214283</u>	<u>-4</u>	<u>508237</u>				(24)
2581478	3101130	52492273	2451758				
<u>501791</u>	1+ <u>449222</u>	-1- <u>246849</u>	-1- <u>339803</u>	1+ <u>442847</u>			
816935	1153929	1012909	3454117	781011			
<u>649236</u>	1+ <u>-1640</u>	-1+ <u>1902526</u>	<u>806232</u>	<u>-241448</u>	-1+ <u>778064</u>		
845923	<u>1333253</u>	<u>2099163</u>	<u>1705577</u>	<u>2763061</u>	<u>1630911</u>		
	<u>653491</u>	<u>-1511407</u>	-3- <u>923179</u>	3+ <u>860759</u>	<u>-1515254</u>	<u>1144771</u>	
1	<u>1189133</u>	<u>1605381</u>	<u>2428381</u>	<u>1042147</u>	<u>1675769</u>	<u>1346252</u>	
	<u>82383</u>	<u>15211</u>	<u>281240</u>	<u>242872</u>	<u>793589</u>	<u>380549</u>	
	1059172	0	295334	812579	1452501	2827616	4958871

* 最適化公式: Lawson ^{opt}

<u>-858444</u>	<u>-858444</u>						
2467085	2467085						
<u>351225</u>	<u>270094</u>	<u>-12615</u>					
2711189	1757717	523111					
<u>1855</u>	<u>201635</u>	<u>-12493</u>	<u>8981</u>				(25)
13693	1318292	521423	1386296				
<u>754479</u>	<u>457600</u>	<u>28666</u>	-60+ <u>823376</u>	59+ <u>286397</u>			
1259705	620251	557773	1608595	890444			
<u>59841</u>	-1- <u>290097</u>	<u>-5021</u>	47+ <u>621473</u>	-45- <u>1599683</u>	<u>363932</u>		
79781	475108	250303	1615646	3163682	725401		
	3+ <u>829451</u>	<u>-2743</u>	-103- <u>556991</u>	101+ <u>716143</u>	<u>-1708613</u>	<u>492462</u>	
1	<u>4823956</u>	<u>2439329</u>	<u>652179</u>	<u>1243950</u>	<u>2298323</u>	<u>578725</u>	
	<u>679326</u>	<u>-8-570914</u>	<u>8+142229</u>	<u>139569</u>	<u>516034</u>	<u>92574</u>	
	3624923	0	1463875	224478	694465	1814007	1107961

* 最適化公式 3: 公式 (S) ^{opt}

<u>-332478</u>	<u>-332478</u>						
1008541	1008541						
<u>29503</u>	<u>97605</u>	<u>-15822</u>					
224417	1887418	603587					
<u>243301</u>	<u>40697</u>	<u>-31123</u>	<u>11279</u>				(26)
1748152	260101	1200170	1305118				
<u>576061</u>	1+ <u>721073</u>	<u>2527</u>	-45- <u>277508</u>	44+ <u>186637</u>			
960827	1149518	45249	1096597	1101230			
<u>847279</u>	-1- <u>547693</u>	<u>-158257</u>	35+ <u>672791</u>	-33- <u>688061</u>	3+ <u>1938</u>		
1128813	1068409	7091280	1192360	882851	3871		
	<u>8097</u>	<u>-2611</u>	-78- <u>48270</u>	76+ <u>38735</u>	<u>-1678819</u>	<u>954422</u>	
1	<u>909514</u>	<u>21403133</u>	<u>279389</u>	<u>655512</u>	<u>2251926</u>	<u>1122319</u>	
	<u>514912</u>	<u>-6-1006462</u>	<u>6+ 688643</u>	<u>259141</u>	<u>423013</u>	<u>217759</u>	
	2881155	0	4408975	1429195	1294748	1488352	2612422

*最適化公式4: 公式(T)^{opt}

343509	343509					
1912259	1912259					
2	105089	151883				
9	1239704	1104983				
3	306598	-3929612	1053			(27)
7	3088071	8967501	1372			
1083410	445305	-679510	6437	1496626		
1555463	1927606	3764313	710733	2349633		
1219689	-16693	725467	1144502	-285851	138831	
1574330	208210	1613784	6493049	3716102	453664	
	612041	-658363	794618	1068356	-112342	265344
1	2687398	1260212	1686081	2036115	267607	369305
	21410		359539	82579	52099	1003705
	294301	0	1249603	436250	380200	4209344
						331541
						4434825

表-3 最適化された公式の特性値

公 式 名	打ち切り精度判定基準		安 定 性		丸め誤差
	A ₀₂	A ₀₃	A (Se)	Si	R
Butcher (2) ^{opt}	1.198343E-3	8.222319E-8	25.10979	-4.2070	2.374E+1
Lawson ^{opt}	1.862042E-3	2.676585E-7	28.03278	6.4628	2.554E+3
公式(S) ^{opt}	1.792681E-3	2.446728E-7	29.82937	-5.9398	4.417E+2
公式(T) ^{opt}	4.586480E-4	4.436325E-8	23.21026	-3.9539	7.665E+0

§6 数値実験と結果の考察

最適化が正しく行われたかどうかを検証するために10個の初期値問題(線形、非線形問題)について数値実験を行った。

<結果1>

刻み幅 0.5 ステップ数 20

$$y' = -y \quad y(0) = 1 \quad (y = \exp(x))$$

誤差	Butcher	Butcher ^{opt}	Lawson	Lawson ^{opt}	公式(S) ^{opt}	*Shanks	公式(T) ^{opt}
最初	1.171E-07	1.171E-07	6.064E-07	5.596E-07	5.437E-07	9.639E-09	9.175E-08
最終	1.753E-10	1.753E-10	9.078E-10	8.378E-10	8.140E-10	1.443E-11	1.373E-10
最大	1.420E-07	1.420E-07	7.356E-07	6.789E-07	6.596E-07	1.169E-08	1.113E-07

$$y' = y^2 - (2y-1)y - x^2 + x - 1 \quad y(0) = 0.5 \quad (y = -x + 1 / (1 + \exp(x)))$$

誤差	Butcher	Butcher ^{opt}	Lawson	Lawson ^{opt}	公式(S) ^{opt}	*Shanks	公式(T) ^{opt}
最初	2.853E-07	2.660E-09	2.513E-08	9.535E-09	9.372E-09	3.516E-09	1.006E-09
最終	5.069E-10	7.188E-11	3.614E-09	5.088E-10	4.750E-10	1.729E-11	1.105E-10
最大	6.218E-07	4.020E-08	1.893E-06	6.802E-08	6.718E-08	8.673E-09	1.909E-08

$$y' = -x^2 y^{(2/3)} \quad y(2) = 1 \quad (y = 9 / (x^3 + 1))$$

誤差	Butcher	Butcher ^{opt}	Lawson	Lawson ^{opt}	公式(S) ^{opt}	*Shanks	公式(T) ^{opt}
最初	1.596E-04	1.990E-05	1.888E-02	7.706E-05	7.342E-05	6.720E-05	6.253E-05
最終	3.036E-08	2.755E-09	3.163E-06	1.607E-08	1.536E-08	1.195E-08	1.149E-08
最大	1.596E-04	1.990E-05	1.888E-02	7.706E-05	7.342E-05	6.720E-05	6.253E-05

$$y' = \sqrt{y} - y/x \quad y(1) = 1/9 \quad (y = x/3 + 1/\sqrt{x})$$

誤差	Butcher	Butcher ^{OPT}	Lawson	Lawson ^{OPT}	公式 (S) ^{OPT}	*Shanks	公式 (T) ^{OPT}
最初	6.460E-06	1.931E-06	1.778E-05	2.994E-06	2.996E-06	1.010E-06	7.768E-07
最終	7.747E-06	2.366E-06	1.977E-05	3.668E-06	3.631E-06	1.297E-06	9.593E-07
最大	7.747E-06	2.366E-06	1.977E-05	3.668E-06	3.631E-06	1.297E-06	9.593E-07

$$y' = x^2 - y/x \quad y(1) = 0 \quad (y = x(x^2 - 1)/2)$$

誤差	Butcher	Butcher ^{OPT}	Lawson	Lawson ^{OPT}	公式 (S) ^{OPT}	*Shanks	公式 (T) ^{OPT}
最初	2.504E-06	6.737E-07	2.242E-06	5.749E-08	6.288E-08	3.599E-06	1.911E-06
最終	2.895E-05	6.337E-06	2.194E-05	6.410E-07	6.747E-07	3.622E-05	1.823E-05
最大	2.895E-05	6.337E-06	2.194E-05	6.410E-07	6.747E-07	3.622E-05	1.823E-05

$$y' = \sin(x) - y \quad y(0) = 0.5 \quad (y = (\sin(x) - \cos(x))/2 + \exp(-x))$$

誤差	Butcher	Butcher ^{OPT}	Lawson	Lawson ^{OPT}	公式 (S) ^{OPT}	*Shanks	公式 (T) ^{OPT}
最初	1.220E-07	1.889E-07	7.870E-07	2.203E-07	1.863E-07	3.023E-08	2.978E-07
最終	4.367E-08	6.224E-07	2.925E-07	3.385E-07	3.516E-07	1.740E-08	6.269E-07
最大	1.289E-07	6.623E-07	1.002E-06	8.810E-07	8.595E-07	1.229E-07	7.384E-07

$$y' = -y + \sin(2x) \quad y(0) = 0.5 \quad (y = (\sin(2x) - 2\cos(2x))/5)$$

誤差	Butcher	Butcher ^{OPT}	Lawson	Lawson ^{OPT}	公式 (S) ^{OPT}	*Shanks	公式 (T) ^{OPT}
最初	5.398E-07	2.366E-06	4.128E-07	3.522E-06	3.496E-05	3.162E-07	9.599E-07
最終	4.092E-07	2.827E-06	1.281E-06	3.333E-06	3.333E-06	4.692E-08	1.871E-06
最大	8.454E-07	2.901E-06	4.402E-06	4.527E-06	4.461E-06	1.030E-06	2.331E-06

$$y' = y \quad y(0) = 1 \quad (y = \exp(x))$$

誤差	Butcher	Butcher ^{OPT}	Lawson	Lawson ^{OPT}	公式 (S) ^{OPT}	*Shanks	公式 (T) ^{OPT}
最初	3.114E-06	3.114E-07	7.999E-07	7.539E-07	7.380E-07	2.039E-06	1.025E-07
最終	8.321E-02	8.321E-02	2.137E-01	2.014E-01	1.972E-01	5.449E-02	2.739E-02
最大	8.321E-02	8.321E-02	2.137E-01	2.014E-01	1.972E-01	5.449E-02	2.739E-02

$$y' = y \cos(x) \quad y(0) = 0.5 \quad (y = \exp(\sin(x)))$$

誤差	Butcher	Butcher ^{OPT}	Lawson	Lawson ^{OPT}	公式 (S) ^{OPT}	*Shanks	公式 (T) ^{OPT}
最初	4.494E-06	1.915E-06	5.227E-06	2.801E-06	2.766E-06	1.402E-07	1.214E-05
最終	5.865E-06	1.065E-06	3.573E-06	2.234E-06	2.204E-06	5.960E-06	9.030E-07
最大	7.779E-05	8.976E-06	1.518E-05	1.475E-05	1.457E-05	2.071E-05	3.313E-06

$$y' = 1 - y^2 \quad y(0) = 0 \quad (y = \tanh(x))$$

誤差	Butcher	Butcher ^{OPT}	Lawson	Lawson ^{OPT}	公式 (S) ^{OPT}	*Shanks	公式 (T) ^{OPT}
最初	8.953E-05	1.519E-06	8.050E-06	3.946E-06	3.877E-06	1.057E-06	7.601E-07
最終	4.516E-12	4.668E-13	4.980E-11	1.077E-11	1.040E-11	1.556E-12	4.325E-12
最大	1.139E-03	6.940E-06	3.351E-04	1.239E-05	1.220E-05	1.057E-06	4.227E-06

< 結果 2 >

刻み幅 0.1 ステップ数 20 >

$$y' = -y \quad y(0) = 1 \quad (y = \exp(x))$$

誤差	Butcher	Butcher ^{OPT}	Lawson	Lawson ^{OPT}	公式 (S) ^{OPT}	*Shanks	公式 (T) ^{OPT}
最初	2.428E-12	2.400E-12	2.230E-11	8.068E-12	7.795E-12	1.057E-12	2.378E-13
最終	7.263E-12	7.180E-12	6.671E-11	2.413E-11	2.331E-11	3.162E-12	8.011E-13
最大	9.871E-12	9.759E-12	9.067E-11	3.281E-11	3.169E-11	4.298E-12	1.088E-12

$$y' = y^2 - (2y-1)y - x^2 + x - 1 \quad y(0) = 0.5 \quad (y = -x + 1/(1 + \exp(x)))$$

誤差	Butcher	Butcher ^{OPT}	Lawson	Lawson ^{OPT}	公式(S) ^{OPT}	*Shanks	公式(T) ^{OPT}
最初	3.418E-12	4.857E-16	5.571E-13	5.844E-14	9.974E-14	3.542E-14	1.210E-14
最終	2.827E-11	1.667E-12	1.230E-11	3.880E-13	2.976E-12	4.597E-13	4.588E-13
最大	3.138E-11	1.667E-12	1.478E-11	5.666E-13	3.105E-12	9.380E-13	4.588E-13

$$y' = -x^2 y^{(2/3)} \quad y(2) = 1 \quad (y = 9/(x^3 + 1))$$

誤差	Butcher	Butcher ^{OPT}	Lawson	Lawson ^{OPT}	公式(S) ^{OPT}	*Shanks	公式(T) ^{OPT}
最初	2.544E-09	1.088E-10	1.542E-07	1.383E-09	1.331E-09	8.402E-11	8.748E-10
最終	5.320E-10	6.746E-12	3.220E-08	3.227E-10	3.119E-10	7.807E-12	1.623E-10
最大	4.193E-09	1.317E-10	2.546E-07	2.370E-09	2.283E-09	1.359E-10	1.398E-09

$$y' = \sqrt{y} - y/x \quad y(1) = 1/9 \quad (y = x/3 + 1/\sqrt{x})$$

誤差	Butcher	Butcher ^{OPT}	Lawson	Lawson ^{OPT}	公式(S) ^{OPT}	*Shanks	公式(T) ^{OPT}
最初	2.566E-10	8.004E-11	1.923E-11	1.294E-10	1.230E-10	4.660E-12	3.251E-11
最終	4.170E-10	1.335E-10	4.906E-11	2.148E-10	2.047E-10	1.930E-11	5.599E-11
最大	4.578E-10	1.450E-10	5.297E-11	2.331E-10	2.219E-10	1.930E-11	6.025E-11

$$y' = x^2 - y/x \quad y(1) = 0 \quad (y = x(x^2 - 1)/2)$$

誤差	Butcher	Butcher ^{OPT}	Lawson	Lawson ^{OPT}	公式(S) ^{OPT}	*Shanks	公式(T) ^{OPT}
最初	2.111E-10	1.596E-11	8.807E-11	3.742E-11	3.332E-12	2.090E-10	5.139E-11
最終	1.893E-09	1.323E-10	1.757E-09	3.301E-11	1.827E-11	2.110E-09	4.385E-11
最大	1.893E-09	1.323E-10	1.757E-09	3.301E-11	1.827E-11	2.110E-09	4.385E-11

$$y' = \sin(x) - y \quad y(0) = 0.5 \quad (y = (\sin(x) - \cos(x))/2 + \exp(-x))$$

誤差	Butcher	Butcher ^{OPT}	Lawson	Lawson ^{OPT}	公式(S) ^{OPT}	*Shanks	公式(T) ^{OPT}
最初	2.716E-12	1.518E-12	1.733E-11	9.195E-11	8.506E-12	1.543E-12	2.927E-12
最終	1.134E-10	1.238E-10	8.647E-10	1.228E-09	1.137E-09	2.063E-10	2.362E-11
最大	1.134E-10	1.238E-10	8.647E-10	1.228E-09	1.137E-09	1.239E-11	2.362E-11

$$y' = -y + \sin(2x) \quad y(0) = 0.5 \quad (y = (\sin(2x) - 2\cos(2x))/5)$$

誤差	Butcher	Butcher ^{OPT}	Lawson	Lawson ^{OPT}	公式(S) ^{OPT}	*Shanks	公式(T) ^{OPT}
最初	6.276E-12	3.036E-11	1.325E-11	5.056E-11	4.825E-11	1.717E-12	1.454E-11
最終	2.942E-11	1.517E-10	1.231E-10	2.101E-10	2.040E-10	3.346E-11	1.070E-10
最大	2.942E-11	1.517E-10	1.742E-10	2.264E-10	2.112E-10	6.761E-11	1.269E-10

$$y' = y \quad y(0) = 1 \quad (y = \exp(x))$$

誤差	Butcher	Butcher ^{OPT}	Lawson	Lawson ^{OPT}	公式(S) ^{OPT}	*Shanks	公式(T) ^{OPT}
最初	2.923E-12	2.985E-12	6.467E-12	5.844E-14	9.974E-14	1.543E-12	2.250E-14
最終	3.909E-10	3.871E-10	8.477E-10	3.880E-13	2.976E-12	2.063E-11	3.009E-11
最大	3.909E-10	3.871E-10	3.871E-10	5.666E-13	3.105E-12	2.063E-11	3.009E-11

$$y' = y \cos(x) \quad y(0) = 0.5 \quad (y = \exp(\sin(x)))$$

誤差	Butcher	Butcher ^{OPT}	Lawson	Lawson ^{OPT}	公式(S) ^{OPT}	*Shanks	公式(T) ^{OPT}
最初	7.984E-12	2.001E-11	4.098E-10	2.699E-11	2.573E-11	1.854E-11	1.544E-11
最終	3.040E-09	2.705E-10	4.080E-10	4.319E-10	4.107E-10	2.719E-10	2.288E-10
最大	3.936E-09	2.705E-10	6.196E-10	4.319E-10	4.107E-10	2.719E-10	2.419E-10

$$y' = 1 - y^2 \quad y(0) = 0 \quad (y = \tanh(x))$$

誤差	Butcher	Butcher ^{opt}	Lawson	Lawson ^{opt}	公式(S) ^{opt}	*Shanks	公式(T) ^{opt}
最初	8.822E-10	5.992E-12	7.171E-11	2.622E-11	2.573E-11	9.462E-12	1.709E-12
最終	9.775E-10	4.528E-11	7.197E-09	4.626E-11	4.243E-10	2.354E-11	5.146E-11
最大	4.225E-09	2.685E-10	1.352E-08	4.598E-10	4.543E-10	2.370E-11	1.052E-10

数値実験結果を比較するために、各初期値問題について最大の誤差のもっとも小さいものに5点を与え以下精度の順位に従って4、3、2、1点と点数をつけ、各公式の総合得点を求めた。表-4にその結果を示す。

表-4 数値実験結果の得点表

公式名		刻み幅 ステップ数	0.5 20	0.1 20
既知	Butcher (2)	15点		11点
	Lawson	2点		8点
	Shanks	3.6点	II	3.6点 II
最適	Butcher(2) ^{opt}	3.2点	III	2.5点 III
	Lawson ^{opt}	1.3点		1.6点
最適	公式(S) ^{opt}	1.9点		1.8点
	公式(T) ^{opt}	3.8点	I	3.7点 I

数値実験結果と表-2～表-4を比較しながら詳細に点検することにより、我々は次のような結論を引き出すことができる。

(1) Butcher (2)^{opt}は、Butcherの3公式中最良な公式であるButcher (2)を、安定性及び丸め誤差に関する性質を劣化させず打ち切り精度の面で著しく改良する。ただし係数が複雑になることは避けられない。

(2) Lawson^{opt}は、Lawsonの公式を安定性を変えず打ち切り精度の面で著しく改良する。ただし実用上は問題にならないと思われるが丸めに関する性質はやや劣化する。

(3) S^{opt}は、有効絶対安定領域の面積が最大の公式であるが、打ち切り精度もよく絶対安定区間の長さもLawsonの公式と殆ど変わらない。また、丸め誤差についても良い性質を持っているので、Lawson、Lawson^{opt}よりも好ましい。

(4) S^{opt}は、既知公式中最良の打ち切り精度をもつShanksの公式と比べて打ち切り精度において優り、丸め誤差についても安全であるのでより好ましい公式である。

謝 辞

おわりに本研究にご協力頂いた研究室の笠原、村松の両君に深く感謝します。

参 考 文 献

- Butcher, J.C. : On Runge-Kutta Processes of High Order, J. Austral Math Soc. Vol 4, pp. 179-194(1964)
- Lawson, J.D. : An Order Six Runge-Kutta Process with Extended Region of Stability, SIAM J. Numer. Anal., Vol 4, pp. 620-625(1967)
- Shanks, E.B. : Solutions of Differential Equations by Evaluations of Functions, Math. Comp., 20, No 93, pp. 21-38(1966)
- Huta, A. : Contribution a la formule de sixième order dans la méthode de Runge-Kutta-Nyström Acta Fac. Nat. Univ. Comenian. Math., Vol 2, 1957, pp. 21-24(1957)
- 田辺国士 : 非線形最小二乗法のアルゴリズム, 応用統計学, Vol. 9, No. 3, pp. 119-140(1981)
- 戸田英雄, 小野令美 : 6個の関数計算による実質的6次のRunge-Kutta法, 情報処理学会論文誌, Vol. 23, No. 6, pp. 857-875(1982)
- 田中正次 : Runge-Kutta法の研究と評価のためのソフトウェア, Computrol No 12, pp. 29-35(1985)
- 田中正次, 山下忠志, 高山尚文, 三村和正, 山下茂(山梨大学) : Runge-Kutta法に関する2つの話題について, 第15回数値解析シンポジウム論文集, pp. 72-79(1986)
- Stanton, G. : Numerical Methods for Science and Engineering, pp. 151-155, PRENTICE-HALL(1961)
- Kuntz, K.S. : Numerical Analysis, McGRAW-HILL(1957)
- Ferziger, J.H. : Numerical Methods for Engineering Application, WILEY(1981)
- 一松 信 : 数値解析, 朝倉書店(1982)

II. 2 段数陰的 Runge - Kutta 法の特徴

1. はじめに

常微分方程式の初期値問題 $y' = f(x, y)$, $y(x_0) = y_0$ に対して

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(x_n + a_1 h, y_n + b_{11} k_1 + b_{12} k_2) \\ k_2 &= hf(x_n + a_2 h, y_n + b_{21} k_1 + b_{22} k_2) \\ y_{n+1} &= y_n + w_1 k_1 + w_2 k_2 \end{aligned} \quad (1.1)$$

によって、 x_n における数値解 y_n から x_{n+1} における数値解 y_{n+1} を求める方法を 2 段数陰的 Runge - Kutta 法という。特に $b_{12} = 0$ の時半陰的（または半陽的）であるという。2 段数で 4 次が可能であるが、我々はそれをも特別な場合として含む 2 段数 3 次陰的 Runge - Kutta 法の安定性と打ち切り精度の関係について研究した。

2. 次数条件式とその解

(1.1) が 3 次法になるために係数 $a_1, a_2, b_{11}, b_{12}, b_{21}, b_{22}, w_1, w_2$ が、満たされなければならない条件式は、以下のようになる。

$$\sum_{i=1}^2 w_i = 1, \sum_{i=1}^2 w_i a_i = 1/2, \sum_{i=1}^2 w_i a_i^2 = 1/3, \sum_{i,j=1}^2 w_i b_{ij} a_j = 1/6, \sum_{j=1}^2 b_{ij} = a_i \quad (i=1, 2) \quad (2.1)$$

これらの条件式を a_1, b_{12} を自由パラメータにして解くと、

$$\begin{aligned} a_2 &= (3a_1 - 2) / \{3(2a_1 - 1)\}, b_{11} = a_1 - b_{12} \\ b_{21} &= (-2a_1 + b_{12} + 1) / \{3(2a_1 - 1)^2\} \\ b_{22} &= (6a_1^2 - 5a_1 - b_{12} + 1) / \{3(2a_1 - 1)^2\} \\ w_1 &= 1 / \{4(3a_1^2 - 3a_1 + 1)\}, w_2 = \{3(2a_1 - 1)^2\} / \{4(3a_1^2 - 3a_1 + 1)\} \end{aligned} \quad (2.2)$$

が得られる。 $a_1 = 1/2$ の時は、解を持たない。

3. 安定性

Runge - Kutta 法の古典的な安定性の概念と理論は、テスト方程式

$$y' = \lambda y \quad (\lambda: \text{複素定数}) \quad (3.1)$$

に対して展開された。

これは微分方程式が (3.1) によってほぼ近似できることを根拠にしている。

しかしその後多くの経験から古典的な理論では不十分であることが次第に明らかになり、近年安定性の理論をより一般的な微分方程式について再構築する試みが多く研究者によってなされている。この研究は著者たちがこれまで行ってきた陰的 Runge - Kutta 法の特徴に関する研究において、古典的な安定性の概念を新しい安定性の概念で置き換えたものである。

まず陰的 Runge - Kutta 法を対象にした新旧の安定性に関する諸概念と、その相互関係に関する若干の結果を述べよう。

S 段数陰的 Runge - Kutta 法

$$\begin{aligned} k_i &= hf(x_n + a_i h, y_n + \sum_{j=1}^s b_{ij} k_j) \quad i=1(1)s \\ y_{n+1} &= y_n + \sum_{i=1}^s w_i k_i \end{aligned} \quad (3.2)$$

をテスト方程式 (3.1) に適用して次数条件式を用いて整理すると、

$$y_{n+1} = R(h\lambda) y_n \quad (3.3)$$

が得られる。ここで $R(h\lambda)$ は $h\lambda$ の有理関数で、例えばここでとりあげている 2 段数 3 次陰的 Runge - Kutta 法については、

$$R(h\lambda) = \{1 + (1 - \beta_0)h\lambda - (\beta_0/2 - 1/3)h^2\lambda^2\} / \{1 - \beta_0 h\lambda + (\beta_0/2 - 1/6)h^2\lambda^2\}$$

となる。但し $\beta_0 = b_{11} + b_{22}$ である。

[定義 1] $R(h\lambda)$ を S 段数陰的 Runge - Kutta 法 (3.2) (以下 (3.2) を省略する) の安定関数という。

[定義 2] $|R(h\lambda)| \leq 1$ であるとき S 段数陰的 Runge - Kutta 法は、絶対安定であるという。

[定義3] $s = \{h\lambda \mid |R(h\lambda)| \leq 1, h\lambda \text{は複素数}\}$ (3.3)によって定義される複素平面上の領域 s を、 S 段数陰的 Runge-Kutta 法の絶対安定領域という。

[定義4] $s = \{h\lambda \mid \operatorname{Re}(h\lambda) < 0, h\lambda \text{は複素数}\}$ であるとき、 S 段数陰的 Runge-Kutta 法は、 A 安定であるという。

変係数の微分方程式

$$y' = \lambda(t)y \quad (\lambda(t) \text{は、} t \text{の複素関数}) \quad (3.4)$$

に S 段数陰的 Runge-Kutta 法を適用すると

$$y_{n+1} = (1 + W_1^T \xi (I - B\xi)^{-1} e^T) y_n \quad (3.5)$$

が得られる。

ここで

$$W1 = (w_1 \ w_2 \ \cdots \ w_s)$$

$$B = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1s} \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2s} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{s1} & b_{s2} & \cdots & b_{ss} \end{bmatrix} \quad (3.6)$$

$$e = (1 \ 1 \ \cdots \ 1)^T$$

$$\xi = \operatorname{diag}(\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_s)$$

$$= \operatorname{diag}\{h\lambda(t_n + a_1 h), h\lambda(t_n + a_2 h), \cdots, h\lambda(t_n + a_s h)\}$$

である。

[定義5] S 段数陰的 Runge-Kutta 法は、もし

$$K(\xi) = 1 + W1^T \xi (I - B\xi)^{-1} e^T \quad (3.7)$$

が、 $\operatorname{Re}(\xi_i) \leq 0$ ($i=1(1)s$) であるようなすべての

$$\xi = \operatorname{diag}(\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_s) \quad (a_i = a_i \rightarrow \xi_i = \xi_i)$$

に対して

$$|K(\xi)| \leq 1 \quad (3.8)$$

ならば AN 安定 であるという。

[定理1] 陰的 Runge-Kutta 法が AN 安定ならば A 安定である。

[定義6] $a_i = a_j$ であるような i, j ($i \neq j$) が存在すれば、Runge-Kutta 法は confluent, でなければ nonconfluent であるという。

同一の Runge-Kutta 法の相異なる初期値から得られる二つの数値解を y_n 及び \tilde{y}_n としよう。

また

$$\langle f(t, \xi_1) - f(t, \xi_2), \xi_1 - \xi_2 \rangle \geq 0, \quad t \geq 0, \xi_1, \xi_2 \in \mathbb{R}^n \quad (3.9)$$

とおこう。

そのとき

[定義7] (3.9)を満足する自励系と全ての $y_n, \tilde{y}_n, h > 0$ に対して

$$\|y_{n+1} - \tilde{y}_{n+1}\| \leq \|y_n - \tilde{y}_n\| \quad (3.10)$$

ならば、その陰的 Runge-Kutta 法は B 安定であるという。

[定義8] (3.9)を満足する全ての関数 $f(t, y)$ と全ての y_n, \tilde{y}_n に対して (3.10) が成立するならば、その陰的 Runge-Kutta 法は BN 安定であるという。

[定理2] 陰的 Runge-Kutta 法が BN 安定ならば B 安定である。

マトリックス M を次式によって定義する。

$$M = WB + B^T W - W1W1^T$$

$$(3.11)$$

ここで、 W, A, B 及び $W1$ は次のような行列及び列ベクトルである。

$$\begin{array}{c|c} A & B \\ \hline & W1^T \end{array} \quad W = \begin{bmatrix} w_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & w_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \vdots & \cdots & w_s \end{bmatrix}$$

[定義9] W, M が正値行列であるRunge-Kutta法を代数的安定であるという。

[定理3] 陰的Runge-Kutta法が代数的安定ならばBN安定である。

[定理4] nonconfluentなRunge-Kutta法に対して

- (1) 代数的安定 \leftrightarrow BN安定
- (2) 代数的安定 \leftrightarrow AN安定
- (3) AN安定 \rightarrow A安定
- (4) BN安定 \rightarrow B安定

である。

また任意のRunge-Kutta法について \rightarrow が成立する。

この研究で取り上げた2段数3次法については

$$B = \begin{vmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{vmatrix}, \quad W = \begin{vmatrix} w_1 & 0 \\ 0 & w_2 \end{vmatrix} \quad (3.12)$$

となるので、(3.11)で定義される M は、

$$M = WB + B^T W - W_1 W_1^T \\ = \begin{bmatrix} 2b_{11}w_1 - w_{12} & b_{12}w_1 + b_{21}w_2 - w_1w_2 \\ b_{12}w_1 + b_{21}w_2 - w_1w_2 & 2b_{22}w_2 - w_2^2 \end{bmatrix} \quad (3.13)$$

となる。

M の固有値を計算するために $|M - \lambda I| = 0$ を計算すると、

$$\lambda^2 + P\lambda + Q = 0 \quad (3.14)$$

ここで

$$P = -2b_{11}w_1 + w_1^2 + w_2^2 - 2b_{22}w_2 \\ Q = -2b_{11}w_1w_2^2 + 4b_{12}b_{22}w_1w_2 - b_{12}^2w_1^2 + 2b_{12}w_1^2w_2 \\ = -2b_{22}w_1^2 - 2b_{12}b_{21}w_1w_2 + 2b_{21}w_1w_2^2 - 2b_{21}w_2^2 \quad (3.15)$$

である。

解の公式を用いると、

$$\lambda_1 = 0 \quad (3.16)$$

$$\lambda_2 = \{-8(3a_1^2 - 3a_1 + 1) + 24a_1^2 + 8a_1 - 1\} / \{8(3a_1^2 - 3a_1 + 1)^2\}$$

M が正値行列であるためには、 $\lambda_2 \geq 0$ が満足されなければならない。

すなわち

$$8(3a_1^2 - 3a_1 + 1)b_{12} - 24a_1^3 + 24a_1^2 - 8a_1 + 1 \leq 0 \quad (3.17)$$

が成立することが必要である。これより $3a_1^2 - 3a_1 + 1 > 0$ であるから

$$b_{12} \leq (24a_1^3 - 24a_1^2 + 8a_1 - 1) / \{8(3a_1^2 - 3a_1 + 1)\} \\ = a_1 - 1 / \{8(3a_1^2 - 3a_1 + 1)\} \quad (3.18)$$

が得られる。これは、ここでとり上げている2段3次法がA安定であるための条件である。

この方法が代数的安定であるためには、なお $w_1 \geq 0, w_2 \geq 0$ であることが必要であるが、

この条件は解系のもっている性質で自動的に満たされる。

すなわち

$$w_1 = 1/4(3a_1^2 - 3a_1 + 1) > 0 \\ w_2 = 3(2a_1 - 1)^2 / \{4(3a_1^2 - 3a_1 + 1)\} \geq 0 \quad (3.19)$$

以上のことからここでとりあげている2段数3次法については、A安定性と代数的安定性が等価であることがわかる。

4. 打ち切り誤差とその大小判定

$$a_{31} = \sum_{i,j,k=1}^2 w_i b_{ij} b_{jk} a_k - 1/24, \quad a_{32} = (\sum_{i,j=1}^2 w_i b_{ij} a_i^3 - 1/2) / 2 \\ a_{33} = \sum_{i,j=1}^2 w_i a_i b_{ij} a_j - 1/8, \quad a_{34} = (\sum_{i=1}^2 w_i a_i^3 - 1/4) / 6 \quad (4.1)$$

とおくと, (1.1) による数値解 Y_{n+1} の局所打ち切り誤差は,

$$T_{n+1} = t_n h^4 + O(h^5)$$

$$t_n = a_{31} f f_v^2 + a_{32} f_v D^2 f + a_{33} D f_v D f + a_{34} D^3 f \quad \left| \begin{array}{l} x = x_n \\ y = y(x_n) \end{array} \right.$$

と表すことができる。

(4.1) と (2.2) より

$$a_{31} = -a_{33} = \{8(b_{12} - a_1)(3a_1^2 - 3a_1 + 1) + 1\} / \{72(2a_1 - 1)^2\}$$

$$a_{32} = -3a_{34} = -(6a_1^2 - 6a_1 + 1) / \{72(2a_1 - 1)\}$$

が得られる。

打ち切り誤差の大小の判定には, 次の判定基準を用いる。

$$A_{33} = \sum_{j=1}^2 a_{3j}^2$$

5. 安定性と打ち切り精度の関係

Fig. 1は横軸に a_1 , 縦軸に b_{12} をとり, それぞれを $[-1, 1]$ の範囲で変動させたときの A_{33} の等高線図, 方法 (1.1) が代数的安定になるような領域及び既知公式の (a_1, b_{12}) を座標とする点を示している (等高線の高さは, $1E-1, 5E-2, 1E-2, 5E-3, 1E-3, 5E-4, 1E-4, 5E-5, 1E-5, 5E-6, 1E-6, 5E-7$)。この図で $b_{12}=0$ の直線を見れば, 半陰的 Runge-Kutta 法に対する A_{33} の変動の模様と, 代数的安定であるための a_1 の範囲がわかる。また既知公式の特性を表-1に示す。

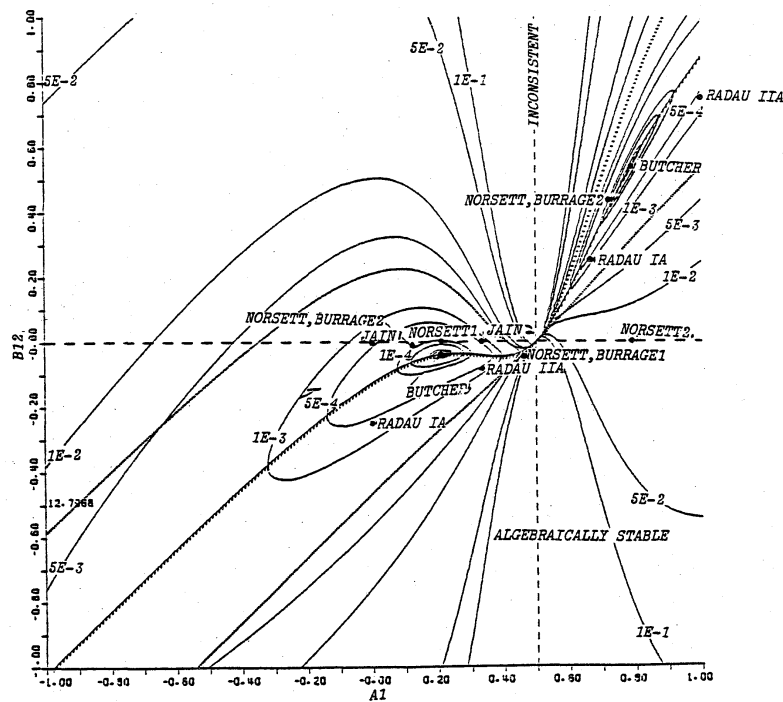


Fig.1 安定性と打ち切り精度の関係

Table 1. 既知公式の特性

公式名	β_0	面積 区間	A_{33}
Butcher	1/2	代数的安定	0.
RadauIA	2/3	代数的安定	6.00137E-4
RadauIIA	2/3	代数的安定	6.00137E-4
Norsett 1	$(3-\sqrt{3})/3$	143.816 (-12.928, 0)	8.30981E-5
Norsett 2	$(3+\sqrt{3})/3$	代数的安定	1.61206E-2
Norsett, Burrage1	$(3+\sqrt{3})/3$	代数的安定	2.50765E-2
Norsett, Burrage2	$(3-\sqrt{3})/3$	143.816 (-12.928, 0)	1.29264E-4
Join 1	1/3	37.926 (-6.000, 0)	6.00137E-4
Join 2	1/3	37.926 (-6.000, 0)	6.00137E-4

6. 数値実験

次の2つの問題について数値実験を行った。結果を表2に示す。

I. $y' = -x^2 y^2 / 3, y(2) = 1$ $h = 0.01$ 100ステップ

II. $y' = 100(\sin x - y), y(0) = 0$ $h = 0.15$ 100ステップ

Iの結果は、打ち切り精度判定基準で測られた各公式の打ち切り精度をよく反映している(表1を見よ)。またIIの結果からは $h\lambda$ がその安定領域を越えてしまったNorsett1, Norsett, Burrage2の公式に対する計算結果の発散が観察される。

Table 2 数値実験結果

I	FIRST STEP		LAST STEP		MAX ERROR
	EXACT	ERROR	EXACT	ERROR	
BUTCHER1	9.867770775190-01	-3.730-12	3.214285714290-01	-3.220-11	-5.260-11
BUTCHER2		-3.730-12		-3.220-11	-5.260-11
NORSETT1		-8.730-10		-8.760-09	-1.310-08
NORSETT, BURRAGE2		-7.750-10		-8.200-09	-1.200-08
RADAU 1A		2.080-09		2.000-08	3.050-08
RADAU 11A		1.650-09		1.750-08	2.550-08
NORSETT2		1.180-08		1.190-07	1.780-07
NORSETT, BURRAGE1		1.050-08		1.110-07	1.620-07

II	FIRST STEP		LAST STEP		MAX ERROR
	EXACT	ERROR	EXACT	ERROR	
BUTCHER1	1.395364711060-01	-4.560-03	6.578189373920-01	7.090-05	-4.560-03
BUTCHER2		-4.560-03		7.090-05	-4.560-03
NORSETT1		-1.140-02		-1.530+03	-1.530+03
NORSETT, BURRAGE2		-1.150-02		-4.340+03	-4.340+03
RADAU 1A		5.930-04		-1.860-03	-2.680-03
RADAU 11A		8.440-04		-1.290-05	8.440-04
NORSETT2		5.450-03		-1.190-03	5.450-03
NORSETT, BURRAGE1		6.100-03		-2.400-04	6.100-03

7. まとめ

Fig. 1は、2段数陰的Runge-Kutta法の特性を判断する上で極めて有効であると思われる。この図からButcherの2つの公式は、代数的安定性を持つと同時に最良の打ち切り精度(4次)を持つことがわかる。

文献

1. Butcher, J.C: Implicit Runge Kutta processes, Math. Comp. 18, pp. 50-64 (1964)
2. Dekker, K. and Verner, J.G.: Stability of Runge-Kutta Method for Stiff Equations, North-Holland (1984)
3. Jain, M.K.: Numerical Solution of Differential Equation (second edition), John Wiley & Sons (1984)